

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЙ РАСЧЕТ ГРАФЕНОВЫХ НАНОЧЕШУЕК С ДОНОРАМИ И АКЦЕПТОРАМИ ПО ПЕРИМЕТРУ

Н. А. Поклонский, С. В. Раткевич, С. А. Вырко, А. И. Сягло

Белорусский государственный университет, Минск

E-mail: poklonski@bsu.by

Для инженерии молекулярных устройств актуальны графеновые нанополоски (GNRs) и вырезанные из них куски (наночешуйки), пассивированные по краям положительно и отрицательно заряженными атомами примесей двух типов (донорами и акцепторами) [1, 2]. Например, графеновые наночешуйки могут быть использованы для создания нового поколения ячеек памяти [2]. Наноленты или наночешуйки, обладающие электрическим дипольным моментом, могут быть также использованы как функциональный элемент (для противодействия залипанию графеновых мембран за счет сил Ван-дер-Ваальса [3]) в электромеханических осцилляторах [4, 5]. Цель работы – оценка величины электрических дипольных моментов d и ширины π -электронной энергетической щели для углеродных наночешуек, пассивированных по краям донорами (атом H отдает электрон атому углерода) и/или акцепторами (атом F принимает электрон от атома углерода).

Расчеты дипольных моментов выполнены для наночешуек, образованных из нанолент типа зигзаг nz GNR (где $n = 4, 5, 6, 7, 8, 9$). Расчетная ячейка содержит 3 периода трансляции nz GNR наноленты. В зависимости от расположения атомов водорода и фтора были исследованы 4 возможных типа пассивации ими краев наночешуек (см. рис. 1).

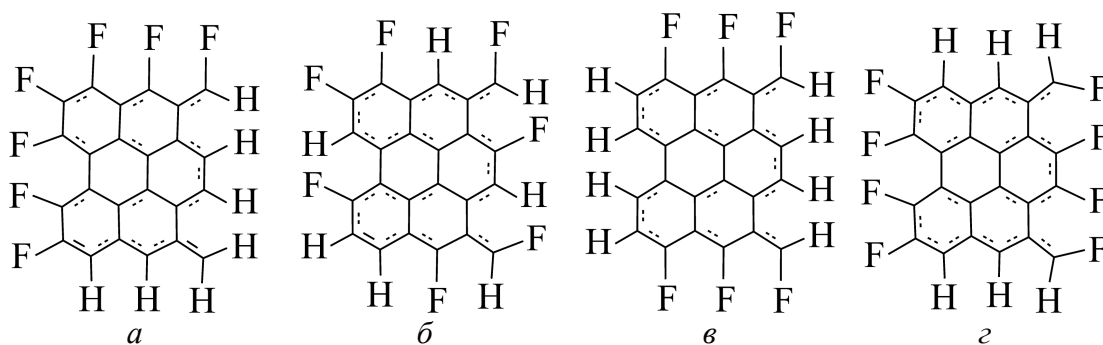


Рис. 1. Структуры наночешуек из нанолент 4zGNR с краевой пассивацией типа 1 (а), типа 2 (б), типа 3 (в) и типа 4 (г), оптимизированные методом UB3LYP

Использовался DFT метод UB3LYP с базисным набором LANL2MB (или STO-3G) в программном пакете Gaussian09 [6]. (Отметим, что расчет методом PM3 в программном пакете MOPAC 2009 [7] дал близкие значения дипольных моментов.) Для оптимизированных наночешуек, например 4zGNR

и 9zGNR, расстояние между атомами водорода и углерода в среднем составило 0,11 нм, а между атомами фтора и углерода – 0,137 нм.

Результаты расчетов электрических дипольных моментов d (1 дебай = $3,336 \cdot 10^{-30}$ Кл·м) наночешуек nz GNRs, где $n = 4-9$, с четырьмя типами пассивации представлены на рис 2, а.

Энергетическая щель в спектре энергий π -электронов для всех зигзаг-цепочек наночешуек nz GNR с пассивацией типа 3 и типа 4 практически равна нулю, а энергетическая щель в зависимости от количества зигзаг-цепочек для наночешуек с пассивацией типа 1 и типа 2 монотонно уменьшается (рис. 2, б). Монотонное уменьшение энергетической щели от 4,3 до 0,89 эВ с увеличением количества зигзаг-цепочек наночешуек nz GNR практически совпадает для двух типов пассивации и позволяет использовать их в качестве фотодетекторов.

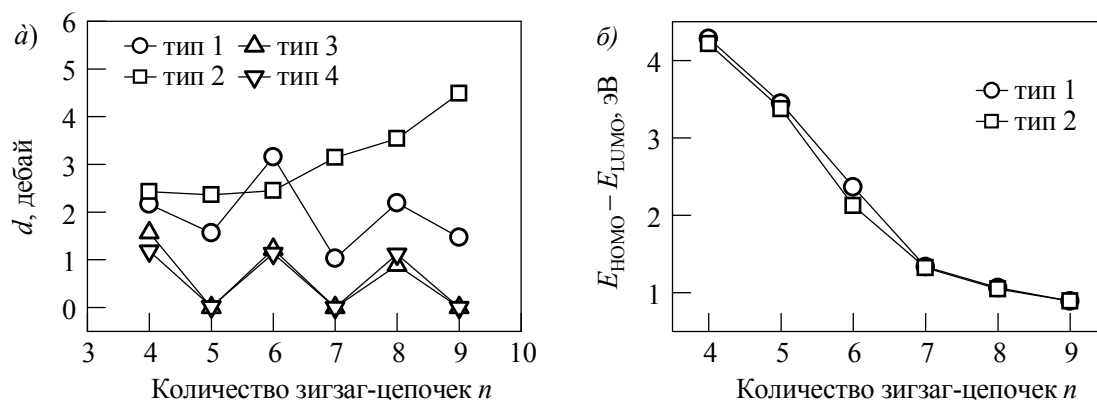


Рис. 2. Зависимости электрического дипольного момента (а) и энергетической щели (б) (разность энергий HOMO и LUMO) от ширины n наночешуек nz GNR, полученные методом UB3LYP

Работа выполнена при поддержке научной программы «Конвергенция» и БРФФИ (гранты № Ф14В-003, Ф14Р-088 и Ф14МН-009).

1. Singh S. K., Neek-Amal M., Peeters F. M. // J. Chem. Phys. 2014. V. 140, No. 7. P. 074304 (9 pp.).
2. Valanarasu S., Kulandaisamy I., Kathalingam A. et al. // J. Nanosci. Nanotechnol. 2013. V. 13, No. 10. P. 6755–6759.
3. Кац Е. И. // УФН. 2015. Т. 185, № 9. С. 964–969.
4. Poklonski N. A., Kislyakov E. F., Vyrko S. A., Ratkevich S. V. // Physics, Chemistry and Applications of Nanostructures. Reviews and Short Notes: Proc. of the Int. Conf. Nanomeeting-2015. Singapore: World Scientific, 2015. P. 613–616.
5. Huang L., Massa L., Matta C. F. // Carbon. 2014. V. 76. P. 310–320.
6. Frisch M. J. et al. Gaussian 09, Revision A.02. Wallingford CT: Gaussian, Inc., 2009. [http://www.gaussian.com].
7. Stewart J. J. P. MOPAC2009, Colorado Springs, CO, USA: Stewart Computational Chemistry, 2008. [http://openmopac.net].